

Predikce krystalových struktur s pomocí experimentálních dat

Predikce krystalových struktur je metoda, při které se navrhuje nové struktury látek či se vytváří modely látek, které se nepodařilo vyřešit jiným způsobem. Výpočty přesných hodnot energie, podle nichž se struktury predikují, však mohou být časově náročné, proto se v práci věnujeme dvěma způsobům, jak predikci urychlit: úpravami algoritmu hledajícího krystalovou strukturu; zapojením experimentálních dat do procesu hledání krystalových struktur.

Primary author: KOČÍ, Milan (CTU FNSPE)